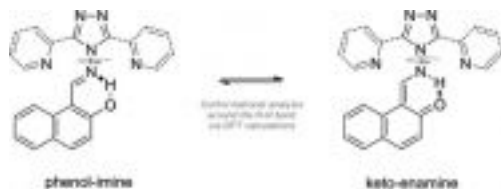


Cálculos realizados en LUSITANIA permiten a investigadores de la Universidad de Extremadura publicar en revista internacional

• Wed, 21/05/2014



El grupo QUOREX [1] de la Universidad de Extremadura [2] ha publicado el artículo científico titulado "[Hydrazones from hydroxy naphthaldehydes. Part 2. Condensations with aromatic N-aminoheterocycles and elucidation of tautomeric structures](#) [3]" en la revista especializada de Química Orgánica [Tetrahedron](#) [4], y que supone una extensión del trabajo previamente publicado: "[Hydrazones from hydroxy naphthaldehydes and N-aminoheterocycles: structure and stereodynamics](#) [5]".

A través de cálculos computacionales DFT realizados con el [supercomputador LUSITANIA](#) [6], se ha podido elaborar un minucioso estudio conformacional sobre las formas tautoméricas imina-enamina, cuyos resultados han confirmado de nuevo la mayor estabilidad de los tautómeros imínicos frente a los enamínicos, en total concordancia con las observaciones experimentales.

La tautomería imina-enamina es de gran importancia biológica y, numerosas biomoléculas y metabolitos actúan a través de una de esas estructuras.

Más información:

- [Hydrazones from hydroxy naphthaldehydes. Part 2. Condensations with aromatic N-aminoheterocycles and elucidation of tautomeric structures](#) [3]

Información relacionada:

- [QUOREX en la Universidad de Extremadura](#) [7]
- [QUOREX en CénitS-COMPUTAEX](#) [8]

Noticias relacionadas:

- [LUSITANIA permite a investigadores de la Universidad de Extremadura publicar en revista internacional de Química Orgánica](#) [9]

Source

URL:<https://web.computaex.es/en/noticias/21052014-calculos-realizados-lusitania-permiten-investigadores-universidad-extremadura>

Links

[1] <https://web.computaex.es/proyecto/quorex> [2] <http://www.unex.es> [3] <https://web.computaex.es/enlaces/publicaciones/hydrazones-hydroxy-naphthaldehydes-part-2-condensations-aromatic-n> [4] <http://www.sciencedirect.com/science/journal/00404020> [5] <https://web.computaex.es/enlaces/publicaciones/hydrazones-hydroxy-naphthaldehydes-and-n-aminoheterocycles-structure-and-stere> [6] <https://web.computaex.es/cenits/lusitania> [7] <http://www.unex.es/investigacion/grupos/quorex/> [8] <https://web.computaex.es/proyectos/quorex> [9] <https://web.computaex.es/noticias/lusitania-permite-investigadores-universidad-extremadura-publicar-en-revista-internacional->